

# FERIENKURS EXPERIMENTALPHYSIK 4

## 2010

### Übung 4 - Musterlösung

#### 1. Übergänge im Wasserstoffatom (\*\*)

Ein Wasserstoffatom befindet sich im angeregten Zustand  $2p$  und geht durch spontane Emission eines Photons in den Grundzustand  $1s$  über.

- a) Berechnen Sie den Einsteinkoeffizienten für diesen Übergang für den Fall eines linear polarisierten Photons.

Hinweise:  $\Psi_{nlm_l}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)$

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}, \quad R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{5/2}} r e^{-r/(2a_0)}$$

$$Y_{00}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta$$

$$\int_0^\infty dr r^n e^{-\alpha r} = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

- b) Die mittlere Lebensdauer des  $2p$ -Zustands beträgt  $\tau = 1.6$  ns. Berechnen Sie die natürliche Breite für die Lyman- $\alpha$ -Linie ( $2p \rightarrow 1s$ ) und vergleichen Sie diese mit der Doppler-Breite bei Zimmertemperatur.
- c) Vergleichen Sie die sich aus b) ergebenden Breiten der Lyman- $\alpha$ -Linie ( $2p \rightarrow 1s$ ) mit der Hyperfeinstrukturaufspaltung (HFS) des Wasserstoffgrundzustandes, die durch die Wellenlänge  $\lambda = 21.1$  cm zwischen den beiden  $F$ -Zuständen charakterisiert ist. Welche Temperatur muss erreicht werden, damit die HFS von einem idealen Spektrometer aufgelöst werden kann?  
Hinweis: Vernachlässigen Sie hierbei die Hyperfeinstruktur der  $2p$  Energieniveaus
- d) Wie groß sind Übergangswahrscheinlichkeit und natürliche Linienbreite des Übergangs  $3s \rightarrow 2p$  im Wasserstoffatom, wenn die Lebensdauer der Zustände  $\tau(3s) = 23$  ns und  $\tau(2p) = 2.1$   $\mu$ s betragen?

#### Lösung

- a) Die Übergangswahrscheinlichkeit ist gemäß der Vorlesung durch

$$A_{ik} = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_{ik}^3}{\varepsilon_0 c^3 h} |\mathcal{M}_{ik}|^2$$

gegeben. Der  $2p$ -Zustand besitzt drei entartete  $m$ -Komponenten ( $m = 0, \pm 1$ ), da es sich jedoch laut Aufgabenstellung hier um ein linear polarisiertes Photon handelt, können wir uns auf  $m = 0$  beschränken.

Zunächst berechnen wir die einzelnen Komponenten des Matrixelements

$$|\mathcal{M}_{ik}|^2 = (\mathcal{M}_{ik})_x^2 + (\mathcal{M}_{ik})_y^2 + (\mathcal{M}_{ik})_z^2$$

mit Hilfe von Kugelkoordinaten. Man erhält

$$\begin{aligned} (\mathcal{M}_{ik})_x &= \int_0^\infty dr r^3 R_{10}(r) R_{21}(r) \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \sin \varphi}_{=0} \int_0^\pi d\vartheta \sin^2 \vartheta Y_{00}(\vartheta, \varphi) Y_{10}(\vartheta, \varphi) = 0 \\ (\mathcal{M}_{ik})_y &= \int_0^\infty dr r^3 R_{10}(r) R_{21}(r) \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi \cos \varphi}_{=0} \int_0^\pi d\vartheta \sin^2 \vartheta Y_{00}(\vartheta, \varphi) Y_{10}(\vartheta, \varphi) = 0 \\ (\mathcal{M}_{ik})_z &= \int_0^\infty dr r^3 R_{10}(r) R_{21}(r) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \cos \vartheta Y_{00}(\vartheta, \varphi) Y_{10}(\vartheta, \varphi) = \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}a_0^4} \underbrace{\int_0^\infty dr r^4 e^{-\frac{3}{2}\frac{r}{a_0}}}_{=4!(2a_0/3)^5} \underbrace{\int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \cos^2 \vartheta}_{=2/3} = \frac{2^{15/2}}{3^5} a_0 \end{aligned}$$

Wir benötigen nun nur noch die Kreisfrequenz  $\omega_{ik}$  des emittierten Photons, welche sich mit Hilfe der Balmerformel für  $n = 1$  und  $m = 2$

$$E = \hbar\omega = \text{Ry}^* \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = \frac{3}{4} \text{Ry}^* = 2\pi \cdot 2.47 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$$

berechnen lässt (Feinstruktur etc. kann hier vernachlässigt werden). Für die Übergangswahrscheinlichkeit erhalten wir letztendlich

$$A_{ik} = \frac{2^9}{3^8} \frac{e^2 a_0^2}{\pi \varepsilon_0 \hbar^4 c^3} \text{Ry}^{*3} = 6.25 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}.$$

- b) Der Zusammenhang zwischen der natürlichen Breite der Lyman- $\alpha$ -Linie und der Lebensdauer  $\tau$  des  $2p$ -Zustandes ist gegeben durch

$$\Delta\nu_{\text{nat}} = \frac{1}{2\pi\tau} = 100 \text{ MHz.}$$

Für die Doppler-Verbreiterung ergibt sich gemäß der Formel aus der Vorlesung bei  $T = 293 \text{ K}$  und der Frequenz  $\nu_0$  die in a) berechnet wurde

$$\Delta\nu_{\text{D}} = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{8 \ln 2 k_{\text{B}} T}{m_{\text{H}}}} = 30.1 \text{ GHz} \approx 300 \cdot \Delta\nu_{\text{nat}}.$$

- c) Beim Übergang  $2p \rightarrow 1s$ , können wir bei hinreichend guter Auflösung zwei Linien erkennen, jeweils für  $F = 0$  und  $F = 1$  der HFS des  $1s$  Energieniveaus. Damit die HFS aufgelöst werden kann, muss die Doppler-Verbreiterung kleiner sein als der Abstand zwischen den beiden Linien.

$$\frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{8 \ln 2 k_B T}{m_H}} \leq \Delta\nu \quad \Rightarrow \quad T \leq \frac{m_H c^2}{8 \ln 2 k_B} \left( \frac{\Delta\nu}{\nu_0} \right)^2 = 0.66 \text{ K.}$$

- d) Der  $3s$ -Zustand kann nur in den  $2p$ -Zustand zerfallen. Deshalb ist die Wahrscheinlichkeit für diesen Übergang

$$A_{ik} = \frac{1}{\tau(3s)} = 4.3 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}.$$

Die natürliche Linienbreite ist

$$\Delta\nu_{\text{nat}} = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{1}{\tau(3s)} + \frac{1}{\tau(2p)} \right) = 83 \text{ MHz.}$$

## 2. Schwingungs-Rotations-Übergänge von HCl (\*\*)

Wir betrachten ein zweiatomiges Molekül und lassen sowohl Schwingung als auch Rotation zu. Die Energie der Schwingungs-Rotationszustände beträgt dann

$$E = E_{\text{vib}} + E_{\text{rot}} = \hbar\omega \left( \nu + \frac{1}{2} \right) + hcB \cdot j(j+1) \text{ mit } \nu = 0, 1, \dots \text{ und } j = 1, 2, \dots$$

Die Schwingungsenergie ist dabei um ein Vielfaches größer als die Rotationsenergie. Im Energiespektrum gehört deshalb zu jedem Schwingungszustand eine Gruppe von Rotationszuständen.

- a) Skizzieren Sie das Energieniveauschema für  $\nu = 1, 2$  und  $j = 0, 1, 2, 3$  und zeichnen Sie die Absorptionsübergänge zwischen den Schwingungs-Rotations-Zuständen ein. Die Auswahlregeln für diese Übergänge sind

$$\begin{aligned} \Delta\nu &= \pm 1 \\ \Delta j &= \pm 1 \end{aligned}$$

- b) Abb. 1 zeigt das Infrarottransmissionsspektrum von Salzsäuredampf (HCl). Wie man erkennt zerfällt es in zwei Teile, einen sogenannten P-Zweig und einen R-Zweig. Ordnen Sie die Peaks im Transmissionsspektrum den Übergängen in ihrem Energie-niveauschema gemäß der angegebenen Nomenklatur zu (R(0), R(1), ..., P(1), P(2), ...). Was charakterisiert P-Übergänge/R-Übergänge? Warum ergibt sich im Spektrum eine Lücke? Welchem Übergang würde das entsprechen? Wie groß ist demnach die Energie des ersten angeregten Vibrationszustandes?

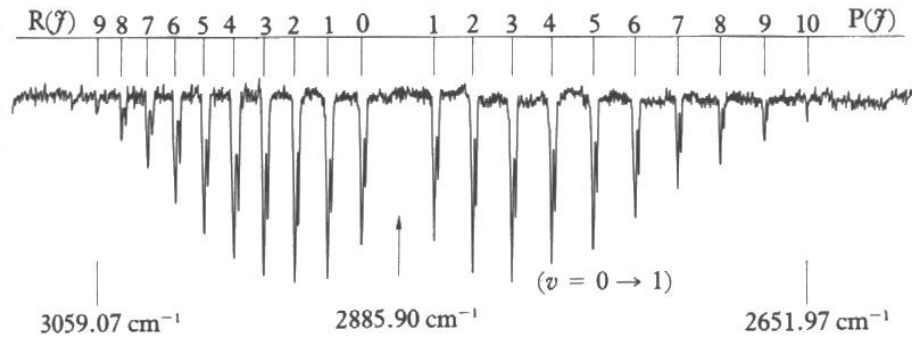


Abbildung 1: Infrarottransmissionsspektrum von HCl.

- c) Berechnen Sie den mittleren Kernabstand  $R$  des HCl-Moleküls.  
Hinweis:  $m_{\text{Cl}} = 5.89 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$ ,  $m_{\text{H}} = 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
- d) Bei genauer Betrachtung fällt auf, dass die Absorptions-Peaks eine Substruktur (Doppelpeak) haben. Wie erklären Sie diese Tatsache?

**Lösung:**

- a) s. Abb 2

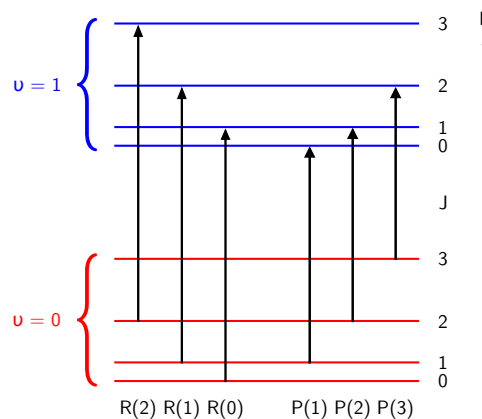


Abbildung 2: Termschema der Schwingungs-Rotations-Zustände für die Quantenzahlen  $\nu = 1, 2$  und  $j = 0, 1, 2, 3$  mit den erlaubten Absorptionsübergängen.

- b) Aus dem Vergleich von Termschema und Transmissionsspektrum erhält man:
- \* Im P-Zweig nimmt die Absorptionsenergie mit sinkendem  $j$ , im R-Zweig mit steigendem  $j$  zu.
  - \* Im P-Zweig gilt  $\Delta j = -1$ , im R-Zweig  $\Delta j = +1$ .

- \* Der Übergang  $J = 0 \rightarrow J = 0$  ist verboten. Deshalb fehlt im Spektrum diese Linie.
- \* Die Energie  $E = hc \cdot \bar{\nu}$  des fehlenden Übergangs entspräche genau der Differenz  $\Delta E = \hbar\omega$  zwischen Schwingungsrundzustand und erstem angeregten Zustand.

Die Energie des ersten angeregten Zustands beträgt

$$E_{\text{vib}}^{(1)} = \frac{3}{2}\hbar\omega = \frac{3}{2}hc\bar{\nu}$$

$$E_{\text{vib}}^{(1)} = \frac{3}{2}hc \cdot 2885.9 \text{ cm}^{-1} = 0.54 \text{ eV}$$

- c) Der Kernabstand kann aus dem Energieintervall zwischen den Rotationspeaks bestimmt werden. Zwischen  $\bar{\nu} = 3059 \text{ cm}^{-1}$  und  $\bar{\nu} = 2652 \text{ cm}^{-1}$  befinden sich 19 (näherungsweise) äquidistante Linien (inklusive des fehlenden Mittelpeaks). Der mittlere Abstand ist dann

$$\Delta\bar{\nu} = \frac{3059 \text{ cm}^{-1} - 2652 \text{ cm}^{-1}}{20} = 20.4 \text{ cm}^{-1}$$

Über die Rotationskonstante erhält man

$$\Delta\bar{\nu} = 2B_e$$

$$R = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi cM\Delta\nu}}$$

$$\rightarrow R = 1.3 \text{ \AA}$$

- d) Chlor kommt in der Natur in zwei Isotopen vor:  $^{35}\text{Cl}$  (75.5%) und  $^{37}\text{Cl}$  (24.5%). Die Massenunterschied führt zu unterschiedlichen Trägheitsmomenten und damit zu verschobenen Absorptionspeaks im Rotationspektrum.

### 3. Moleküle im interstellaren Medium (\*\*)

In der Radio- und Infrarotastronomie beobachtet man u.a. auch Moleküllinien im interstellaren Medium. Aus diesen Beobachtungen können Rückschlüsse auf die galaktische Verteilung und Häufigkeit der Moleküle sowie auf Sternentstehungsgebiete und -mechanismen gezogen werden.

- a) Kohlenmonoxid  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  emittiert beim Übergang vom ersten angeregten Rotationsniveau ( $J = 1$ ) zum Grundzustand ( $J = 0$ ) eine Linie der Wellenlänge  $\lambda_0 = 2.6 \text{ mm}$ . Berechnen Sie die dazu gehörige Energie und den Abstand der beiden Atome im Molekül.
- b) Berechnen Sie die Energie und Frequenz des gleichen Übergangs auch für das Molekül  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$  sowie die relative Frequenzverschiebung.

Hinweis: Nehmen Sie den gleichen Abstand  $R$  wie bei  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ .

### Lösung

a) Die reduzierte Masse beträgt

$$\mu = \frac{12u \cdot 16u}{12u + 16u} \approx 6,86u.$$

$$E_0 = \frac{hc}{\lambda_0} = \frac{1240 \text{ eVnm}}{2,6 \cdot 10^6 \text{ nm}} \approx 4,8 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$$

$$E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) = BJ(J+1)$$

mit dem Trägheitsmoment  $I = \mu R^2$  und der Rotationskonstanten  $B = \frac{h^2}{8\pi^2 I}$ .  
Beim Übergang von ( $J = 1$ ) nach ( $J = 0$ ) gilt

$$\Delta E_{1 \rightarrow 2} = 2B = \frac{hc}{\lambda_0}$$

$$\Rightarrow B = \frac{gc}{2\lambda_0}$$

$$\Rightarrow R = \sqrt{\frac{h\lambda_0}{4\pi^2 c\mu}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2,6 \cdot 10^6 \text{ nm} \cdot 1240 \text{ eVnm}}{6,86 \cdot 931,5 \text{ MeV}}} \approx 1,13 \text{ \AA}$$

b) Beim  $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$  ändert sich im Vergleich zu  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  nur die reduzierte Molekülmasse

$$\mu_{13} = \frac{13u \cdot 16u}{13u + 16u} \approx 7,17u.$$

Damit ergibt sich für die Energie

$$\Delta E_{13} = \frac{\mu_{12}}{\mu_{13}} \Delta E_{12} \approx 4,6 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$$

$$\nu_{13} = \frac{\Delta E_{13}}{h} \approx 111 \text{ GHz}$$

$$\frac{\Delta \nu}{\nu_{12}} = \frac{\Delta E}{E_{12}} = 1 - \frac{\mu_{12}}{\mu_{13}} \approx 0,04.$$